

IN THE UNITED STATES PATENT AND TRADEMARK OFFICE

Attorney Docket No. 249/408

In re patent application of

Sangjoon HAHN, et al.

Group Art Unit: (Unassigned)

Serial No. (Unassigned)

Examiner: (Unassigned)

Filed: Concurrently

For: METHOD AND APPARATUS OF ESTIMATING PURE SPECTRA AND A
CONCENTRATION OF A MIXTURE

CLAIM FOR CONVENTION PRIORITY

Commissioner for Patents
P.O. Box 1450
Alexandria, VA. 22313-1450

Sir:

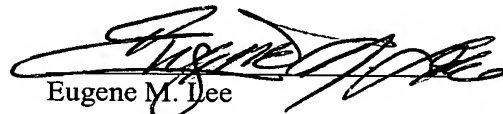
The benefit of the filing date of the following prior foreign application filed in the following foreign country is hereby requested, and the right of priority provided in 35 U.S.C. § 119 is hereby claimed.

In support of this claim, filed herewith is a certified copy of said original foreign application:

Korean Application No. 2003-5198, filed January 27, 2003.

Respectfully submitted,

September 22, 2003
Date



Eugene M. Lee
Reg. No. 32,039
Richard A. Sterba
Reg. No. 43,162

LEE & STERBA, P.C.
1101 Wilson Boulevard Suite 2000
Arlington, VA 20009
Telephone: (703) 525-0978

대한민국 특허청

KOREAN INTELLECTUAL
PROPERTY OFFICE

별첨 사본은 아래 출원의 원본과 동일함을 증명함.

This is to certify that the following application annexed hereto
is a true copy from the records of the Korean Intellectual
Property Office.

출원번호 : 10-2003-0005198
Application Number

출원년월일 : 2003년 01월 27일
Date of Application JAN 27, 2003

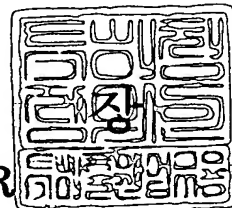
출원인 : 삼성전자주식회사
Applicant(s) SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD.



2003 년 02 월 07 일

특 허 청

COMMISSIONER



【서지사항】

【서류명】	특허출원서
【권리구분】	특허
【수신처】	특허청장
【참조번호】	0009
【제출일자】	2003.01.27
【국제특허분류】	H04B
【발명의 명칭】	혼합물로부터 순수 스펙트럼 및 농도 추정방법
【발명의 영문명칭】	Method of estimating pure spectra and concentration from mixture
【출원인】	
【명칭】	삼성전자 주식회사
【출원인코드】	1-1998-104271-3
【대리인】	
【성명】	이영필
【대리인코드】	9-1998-000334-6
【포괄위임등록번호】	2003-003435-0
【대리인】	
【성명】	이해영
【대리인코드】	9-1999-000227-4
【포괄위임등록번호】	2003-003436-7
【발명자】	
【성명의 국문표기】	한상준
【성명의 영문표기】	HAN, Sang Joon
【주민등록번호】	670808-1384118
【우편번호】	121-771
【주소】	서울특별시 마포구 도화1동 도화현대아파트1차 107동 504호
【국적】	KR
【발명자】	
【성명의 국문표기】	조혜민
【성명의 영문표기】	CHO, Hei Min
【주민등록번호】	800106-2163210
【우편번호】	449-712

【주소】	경기도 용인시 기흥읍 삼성종합기술원 M-응용팀 기숙사 C-515		
【국적】	KR		
【발명자】			
【성명의 국문표기】	윤길원		
【성명의 영문표기】	Y00N,Gil Won		
【주민등록번호】	550427-1000813		
【우편번호】	133-767		
【주소】	서울특별시 성동구 옥수2동 현대아파트 104동 601호		
【국적】	KR		
【발명자】			
【성명의 국문표기】	전계진		
【성명의 영문표기】	JEON,Kye Jin		
【주민등록번호】	680410-2117620		
【우편번호】	440-320		
【주소】	경기도 수원시 장안구 율전동 신일아파트 107동 903호		
【국적】	KR		
【발명자】			
【성명의 국문표기】	황인덕		
【성명의 영문표기】	HWANG,In Duk		
【주민등록번호】	711228-1396716		
【우편번호】	440-705		
【주소】	경기도 수원시 장안구 율전동 삼성아파트 203동 1303호		
【국적】	KR		
【공개형태】	학술단체 서면발표		
【공개일자】	2002.09.22		
【심사청구】	청구		
【취지】	특허법 제42조의 규정에 의한 출원, 특허법 제60조의 규정에 의한 출원심사를 청구합니다. 대리인 이영필 (인) 대리인 이해영 (인)		
【수수료】			
【기본출원료】	20	면	29,000 원
【가산출원료】	2	면	2,000 원

1020030005198

출력 일자: 2003/2/10

【우선권주장료】	0	건	0	원
【심사청구료】	7	항	333,000	원
【합계】	364,000			원
【첨부서류】	1. 요약서·명세서(도면)_1통 2. 공지에외적용대상(신규성상 실의예외, 출원시의특례)규정을 적용받 기 위한 증명서류_1 통			

【요약서】**【요약】**

혼합물로부터 각 성분들의 순수 스펙트럼 및 농도를 추정하기 위한 방법이 개시된다. 각각 다른 농도를 갖는 p 종류의 성분이 섞여 있는 n 개의 혼합물 샘플로부터 각 성분들의 순수 스펙트럼 및 농도를 추정하는 방법에 있어서, (a) m 개의 파장을 이용하여 측정한 상기 n 개의 혼합물의 스펙트럼에 대하여 주성분분석을 실시하여 인자들과 각 인자에 대한 스코어로 나타내는 단계, (b) 상기 (a) 단계에서 생성되는 인자들 중 사용하고자 하는 인자수를 선정하는 단계, 및 (c) 상기 (b) 단계에서 선정된 수의 인자의 스코어에 대하여 독립성분분석을 실시하여 각 성분의 순수 스펙트럼과 농도를 추정하는 단계를 포함한다.

【대표도】

도 1

【명세서】**【발명의 명칭】**

혼합물로부터 순수 스펙트럼 및 농도 추정방법(Method of estimating pure spectra and concentration from mixture)

【도면의 간단한 설명】

도 1은 본 발명의 일실시예에 따른 혼합물로부터 순수 스펙트럼 및 농도 추정방법의 흐름도,

도 2a 내지 도 2c는 도 1에 있어서 인자수 선정단계를 설명하기 위한 각 인자와 프레스와의 관계를 나타낸 그래프,

도 3은 글루코오스와 수크로오스의 순수 스펙트럼,

도 4는 각각 글루코오스와 수크로오스의 농도를 달리하여 만든 25 개의 혼합물의 스펙트럼,

도 5a 및 도 5b는 도 4의 혼합물의 스펙트럼에 대하여 본 발명을 적용한 경우 생성되는 각 성분의 순수 스펙트럼, 및

도 6a 및 도 6b는 도 4의 혼합물의 스펙트럼에 대하여 본 발명을 적용한 경우 생성되는 각 성분의 농도를 나타낸다.

【발명의 상세한 설명】

【발명의 목적】

【발명이 속하는 기술분야 및 그 분야의 종래기술】

- <7> 본 발명은 혼합물의 스펙트럼 분석에 관한 것으로서, 특히 혼합물의 스펙트럼에 대하여 주성분분석 및 독립성분분석을 통하여 혼합물을 구성하는 각 성분의 순수 스펙트럼 및 농도를 추정하기 위한 방법 및 장치에 관한 것이다.
- <8> 혼합물의 스펙트럼으로부터 농도를 추정하기 위하여 일반적으로 사용되는 PCR(Principal Component Regression)은 두개의 단계로 이루어지는 다변량 분석법이다. 첫번째 단계는 주성분분석(Principal Component Analysis) 단계로서, 측정된 스펙트럼을 특이치분해(Singular Value Decomposition; SVD)하여 팩터와 스코어의 곱으로 분해한다. 통상 SVD를 통하여 구한 팩터와 스코어는 각각 구성성분의 순수 스펙트럼과 농도와 일치하지 않기 때문에, 주성분분석만으로는 혼합물의 스펙트럼으로부터 순수 스펙트럼은 물론 농도조차 추정하기가 어렵다. 따라서, 농도를 추정하기 위해서는 혼합물의 스펙트럼 이외의 추가 정보 즉, PCR에서는 혼합물의 농도에 관한 정보를 필요로 하게 된다. 두번째 단계에서는 추가로 획득한 정보 즉, 농도를 PCA에서 산출한 스코어로 회귀(regression)하여 회귀벡터(regression vector)를 구한다. 이와 같이 스코어와 농도의 회귀식으로부터 얻어진 회귀벡터는 추정하고자 하는 특정성분 이외에 혼합물에 섞여 있는 다른 성분들의 순수 스펙트럼들과 반대로 바뀐(contravariant) 벡터이긴 하지만, 특정성분의 순수 스펙트럼과 일치하지는 않는다. PCR을 통하여 얻은 회귀벡터를 이용하여 혼합물의 스펙트럼으로부터 특정성분의 농도를 추정할 수는 있으나 순수 스펙트럼까지 추정하기는 어렵다.

<9> 결론적으로 PCR에서는 혼합물을 구성하고 있는 각 성분들의 순수 스펙트럼을 추정하는 것이 불가능할 뿐 아니라 정확한 농도를 추정하기 위해서는 사전에 농도를 정확히 알고 있는 별도의 조정세트(calibration set)를 필요로 하는 단점이 있다. 또한, 혼합물의 스펙트럼 정보만 가지고 있을 경우에는 조정(calibration) 자체가 불가능하기 때문에 상기와 같은 다변량 분석법을 사용할 수 없게 되는 단점이 있다.

【발명이 이루고자 하는 기술적 과제】

<10> 따라서 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제는 혼합물의 스펙트럼에 대하여 주성분분석(Principal Component Analysis)과 독립성분분석(Independent Component Analysis)을 적용하여 혼합물에 대한 스펙트럼만으로도 혼합물을 구성하는 성분들의 순수 스펙트럼 및 농도를 추정하기 위한 방법을 제공하는데 있다.

<11> 상기 기술적 과제를 달성하기 위하여 본 발명은 각각 다른 농도를 갖는 p 종류의 성분이 섞여 있는 n 개의 혼합물 샘플로부터 각 성분들의 순수 스펙트럼 및 농도를 추정하는 방법에 있어서, (a) m 개의 파장을 이용하여 측정한 상기 n 개의 혼합물의 스펙트럼에 대하여 주성분분석을 실시하여 인자들과 각 인자에 대한 스코어로 나타내는 단계; (b) 상기 (a) 단계에서 생성되는 인자들 중 사용하고자 하는 인자수를 선정하는 단계; 및 (c) 상기 (b) 단계에서 선정된 수의 인자의 스코어에 대하여 독립성분분석을 실시하여 각 성분의 순수 스펙트럼과 농도를 추정하는 단계를 포함한다.

<12> 또한, 상기 (c) 단계는 (c1) 상기 인자들의 스코어에 대하여 독립성분분석을 실시하여 혼합행렬과 독립성분들로 분해하는 단계; (c2) 상기 (b) 단계에서 선정된 인자와 상기 (c1) 단계에서 얻어진 혼합행렬의 곱을 각 성분의 순수 스펙트럼으로 추정하는 단

제; 및 (c3) 상기 (c1) 단계에서 얻어진 독립성분들을 상기 혼합물에 섞여 있는 성분들의 농도에 비례하는 값으로 추정하는 단계로 이루어지는 것이 바람직하다.

【발명의 구성 및 작용】

<13> 이하, 본 발명의 실시예에 대하여 첨부된 도면들을 참조하여 상세하게 설명하기로 한다.

<14> 먼저, 혼합물의 스펙트럼은 다음 수학식 1에서와 같이 혼합물에 섞여 있는 개개의 구성성분에 의한 스펙트럼의 선형합으로 표현할 수 있다.

<15> **【수학식 1】**
$$A_w = A_{a,w} + A_{b,w} + A_{c,w}$$

<16> 여기서, A_w 는 파장 w 에서의 혼합물의 스펙트럼, $A_{a,w}$, $A_{b,w}$ 및 $A_{c,w}$ 는 각각 파장 w 에서의 구성성분 a , b 및 c 의 스펙트럼을 나타낸다.

<17> 한편, 개개의 구성성분의 스펙트럼은 다음 수학식 2에서와 같이 순수 스펙트럼과 농도의 곱으로 표현할 수 있다.

<18> **【수학식 2】**
$$A_{c,w} = K_{c,w} \times C_c$$

<19> 여기서, $A_{c,w}$ 는 파장 w 에서의 구성성분 c 의 스펙트럼, $K_{c,w}$ 는 구성성분 c 의 파장 w 에서의 순수 스펙트럼, C_c 는 구성성분 c 의 농도를 각각 나타낸다.

<20> 상기 수학식 1은 수학식 2를 적용하여 다음 수학식 3과 같이 표현할 수 있다.

<21> **【수학식 3】**
$$A_w = K_{a,w} \times C_a + K_{b,w} \times C_b + K_{c,w} \times C_c$$

<22> 또한, 각각의 구성성분의 농도를 달리하여 여러 개의 혼합물을 만들어서 스펙트럼을 측정한 경우에는 다음 수학식 4와 같이 표현할 수 있다.

<23> 【수학식 4】 $A_{w,n} = K_{a,w} \times C_{a,n} + K_{b,w} \times C_{b,n} + K_{c,w} \times C_{c,n}$

<24> 여기서, $A_{w,n}$ 는 n번째 혼합물의 파장 w에서의 스펙트럼, $K_{a,w}$, $K_{b,w}$, $K_{c,w}$ 는 각각 구성성분 a, b, c의 파장 w에서의 순수 스펙트럼, $C_{a,n}$, $C_{b,n}$, $C_{c,n}$ 는 각각 n번째 혼합물에서 구성성분 a, b, c의 농도를 각각 나타낸다.

<25> 상기 수학식 4를 행렬로 표시하면 다음 수학식 5와 같이 표현할 수 있다.

<26> 【수학식 5】 $A = M \cdot C$

<27> 즉, 혼합물의 스펙트럼(A)은 각 구성성분의 순수 스펙트럼(M)과 농도(C)의 곱으로 표현된다. 이때, 혼합물의 수를 n, 혼합물의 스펙트럼을 측정한 파장의 수를 m, 구성성분의 수를 p라 하면, 행렬 A의 차원은 (m,n)이 되고, 행렬 M의 차원은 (m,p)이 되고, 행렬 C의 차원은 (p,n)이 된다.

<28> 상기한 바와 같은 혼합물의 스펙트럼 특성을 바탕으로 하여 본 발명을 설명하면 다음과 같다.

<29> 도 1은 혼합물의 스펙트럼으로부터 각 성분의 순수 스펙트럼 및 농도를 추정하기 위한 본 발명의 바람직한 일실시예에 따른 흐름도로서, 주성분분석 실시단계(11 단계), 인자수 선정단계(13 단계), 독립성분분석 실시단계(15 단계), 순수 스펙트럼 및 농도 추정단계(17 단계)로 이루어진다.

<30> 도 1을 참조하면, 주성분분석 실시단계(11 단계)에서는 측정된 혼합물의 스펙트럼(A)에 대하여 주성분분석(PCA)을 수행하여, 혼합물의 스펙트럼(A)을 가장 기본적인 변량들로 분해한다. 이를 위하여, 11 단계에서는 측정된 혼합물의 스펙트럼(A)에 대하여 특이치분해(SVD)를 적용함으로써 다음 수학식 6과 같이 인자(F)와 스코어(S)의 곱으로 분

해한다. 여기서, 인자(F)는 혼합물의 스펙트럼(A)의 가장 공통적인 변량으로서, 고유벡터(eigenvector) 또는 주성분을 의미하고, 스코어(S)는 각 주성분에 대응하는 스케일링 계수를 의미한다.

<31> **【수학식 6】** $A = U S V' = F S$

<32> 여기서, 혼합물의 수를 n , 혼합물의 스펙트럼을 측정한 파장의 수를 m , 구성성분의 수를 p 라 하면, 행렬 A 의 차원은 (m,n) 이 되고, U 는 (m,m) 차원의 직교 행렬, V 는 (n,n) 차원의 직교 행렬, S 는 공분산 σ_{ij} (여기서, $i \neq j$)가 '0'인 특이치로 이루어지는 (m,n) 차원의 대각선 행렬이 된다. 한편, 인자(F)의 차원은 (m,p) 가 되고, 스코어(S)의 차원은 (p,n) 이 된다. 상기 수학식 6으로부터 인자(F)는 US , 스코어(S)는 V' 로 각각 나타낼 수 있다. 즉, PCA에 의하면 원래의 스펙트럼(A)에서 원 변수들의 총분산의 대부분, 예를 들면 80 내지 90%를 차지하는 주성분들을 추후 단계에서 사용할 최적 인자수로 결정하고, 분산의 아주 작은 부분을 차지하는 나머지 인자들은 잡음으로 간주하여 제거할 수 있다. 여기서, 주성분분석에 의하여 도출된 스코어는 상관관련성이 없어지게 된다.

<33> 한편, 상기 수학식 5의 순수 스펙트럼(M)에 대하여 특이치분해를 적용할 경우 다음 수학식 7과 같이 표현되는 것으로 가정한다.

<34> **【수학식 7】** $M = u s v'$

<35> 여기서, 혼합물에 포함되어 있는 구성성분들의 농도가 서로 독립적인 경우, 상기 수학식 5의 농도(C)의 공분산행렬은 단위행렬이 되기 때문에, 상기 수학식 6 및 수학식 7에 대하여 다음 수학식 8이 성립될 수 있다.

<36> 【수학식 8】 $U = u, S = s, V' = v'C$

<37> 따라서, 인자(F), 스코어(S), 순수 스펙트럼(M) 및 농도(C) 간에는 다음 수학식 9
에서와 같은 관계가 성립한다.

<38> 【수학식 9】 $M = u s v' = U S v' = F v'$

<39> $C = (v')^{-1} V' = (v')^{-1} S$

<40> $S = v' C$

<41> 즉, 적절한 행렬 v' 를 구하여 인자(F)에 곱하면 순수 스펙트럼(M)이 얻어지고,
 $(v')^{-1}$ 을 스코어(S)에 곱하면 농도(C)와 같아지게 된다.

<42> 한편, 주성분분석 실시단계(11 단계)에 앞서, m 개의 파장을 이용하여 측정한 상기
n 개의 혼합물의 스펙트럼 중 추정하고자 하는 성분의 정보를 포함하며, 잡음이 작은
대역을 분석대역으로 선정한다. 또한, 인체조직의 스펙트럼에 포함된 산란 및 잡음성분
을 제거하기 위하여 MSC(Multiplicative Scatter Correction), 평균센터링
(Mean-centering), 자동스케일링(Autoscaling) 등의 데이터 전처리 기법을 주성분분석
실시단계(11)에 앞서 상기 n 개의 혼합물의 스펙트럼에 대하여 실시한다.

<43> 인자수 선정단계(13 단계)에서는 주성분분석 실시단계(11)에 의해 생성되는 인자들
(F) 중 독립성분분석 실시단계(15)에서 사용하고자 하는 인자수를 선정한다. 이에 대하
여 도 2a 내지 도 2c를 참조하여 세부적으로 설명하기로 한다. 도 2a 및 도 2b는 잡음
이 없는 경우 각 인자와 프레스와의 관계를 나타낸 그래프이고, 도 2c는 잡음이 있는 경
우 각 인자와 프레스와의 관계를 나타낸 그래프이다.

<44> 인자수 선정단계(13 단계)에서는 먼저 주성분분석 실시단계(11)에 의해 생성되는 각각의 인자(F)에 대하여 프레스(PRESS)라는 통계량을 계산한다. 프레스는 분산(variance)이고 볼 수 있으며, 잡음이 없는 이상적인 경우에는 도 2a 및 도 2b에 도시된 바와 같이 혼합물에 존재하는 성분의 수에 해당하는 인자(F)만이 프레스가 0 이 아닌 값을 가질 수 있고, 그 이상의 인자(F)에 대해서는 프레스가 0 이 된다. 즉, 도 2a 및 도 2b에 도시된 그래프를 통하여 혼합물에 각각 2개 및 3개의 성분이 존재하는 것을 알 수 있다. 이와 같이 잡음이 존재하지 않는 경우에는 단순히 프레스를 이용하여 혼합물을 구성하는 성분의 수를 추측할 수 있다.

<45> 그러나, 잡음이 존재하는 통상의 경우에는 도 2c에서와 같이 프레스가 어느 순간 갑자기 0 으로 떨어지는 경우는 없고 애매모호한 값을 가지게 된다. 이런 경우 f-검증을 이용하여 프레스가 0 이라고 볼 수 있는 위치를 통계적으로 추정한다. f-검증을 수행하는 구체적인 방법은 먼저 다음 수학적 식 10을 이용하여 f-ratio 를 구한다.

<46>

$$F_k = \frac{PRESS_k - PRESS_{\min}}{PRESS_{\min}} \frac{n}{n-k}$$

【수학적 식 10】

<47> 상기 수학적 식 10에서 F_k 는 k 번째 인자의 f-ratio를 의미하고, $PRESS_{\min}$ 은 프레스 값 중 가장 작은 것을 의미하며, n 은 측정된 스펙트럼의 수를 의미한다.

<48> 다음 단계로, f-ratio 를 파라미터로 하여 각 인자(F)에 대한 f-값을 구한다. 마지막으로 f-값이 처음으로 0.95 보다 크게 되는 인자(F)의 수가 혼합물에 존재하는 성분의 수와 같을 것이라고 추정한다. 여기서 0.95 라는 수를 선택한 이유는 추정의 신뢰도를 95% 로 하는 것이 일반적이기 때문이다.

<49> 독립성분분석 실시단계(15 단계)에서는 상기 수학식 9에 있어서 상기 행렬 v' 를 구하기 위하여 주성분분석 단계(11 단계)에서 사용하지 않은 높은 차수, 즉 주성분분석에서는 고려하지 않은 3차 이상의 높은 차수의 통계량까지도 서로 통계적으로 독립적(independent)이 되도록 한다. 즉, 농도(C)가 높은 차수에서도 독립적인 경우에는 농도(C)의 통계적 다차원 텐서는 오직 대각선 부분에만 채워지고, 나머지 부분은 '0'이 된다. 한편, 주성분분석에 의해 얻은 스코어(S)는 $v'C$ 가 되므로 비록 v' 이 직교하더라도 $v'C$ 의 다차원 텐서는 농도(C)의 다차원 텐서와는 달리 대각선 이외에 '0'이 아닌 부분이 존재할 수 있다. 따라서, 스코어(S)를 로테이션시켜 가면서 다차원 텐서를 구하여 대각선 부분만 '0'이 되도록 하는 로테이션 v' 를 찾을 수 있다.

<50> 독립성분분석(15 단계)에서는 상기 13 단계에서 선정된 수의 인자(F)의 스코어(S)에 대하여 독립성분분석을 실시하여 다음 수학식 11에서와 같이 혼합행렬(mixing matrix, W)과 독립성분들(IC)로 분해한다.

<51> 【수학식 11】 $S = W \cdot IC$

<52> 한편, 수학식 9와 수학식 11은 모두 스코어(S)를 두 개의 매트릭스로 분해하여 표현하고 있다는 공통점을 가지고 있으며, IC와 C가 비록 표현되는 형식은 다르더라도 독립성분분석에서는 IC와 C의 통계적인 양이 같으면 동일한 것을 표현하고 있다고 간주한다. 여기서 통계적인 양이라 함은 주성분분석에서 사용한 2차수 통계량(second-order statistics)뿐만 아니라 독립성분분석에서 사용한 2차수 이상의 통계량(higher-order statistics)을 모두 포함한다. 따라서, 주성분분석에서 도출된 스코어(S)의 2차수 통계량이 C의 2차수 통계량과 같다고 해서 두 양이 같은 것을 표현하고 있다고 할 수는 없고, 독립성분분석에서 도출된 IC처럼 2차 이상의 고차수 통계량까지

같은 값을 가져야 비로서 동일한 것으로 판단한다. 본 발명의 전제조건으로 각 성분의 농도(C)가 서로 독립적이며, 또한 독립성분분석에서 도출된 독립성분들(IC)도 역시 서로 독립적이므로 이들은 동일한 물리적인 양을 표현하고 있고, 비록 두 양이 정확히 동일한 값을 가지지 않더라도 서로 비례하는 관계를 가질 수 있다. 즉, $C = \text{비례상수} \cdot IC$ 로 나타낼 수 있으며, 따라서 수학식 9 및 수학식 11에서 나타난 v' 와 W 도 서로 비례하는 관계를 가지게 된다.

<53> 순수 스펙트럼 및 농도 추정단계(17 단계)에서는 독립성분분석 실시단계(15)에 의해 생성된 상기 수학식 11을 상기 수학식 6에 대입함으로써 다음 수학식 12와 같은 결과를 얻는다.

<54> 【수학식 12】 $A = F \cdot S = F \cdot W \cdot IC$

<55> 결론적으로, 상기 수학식 12에 있어서, 인자(F)와 혼합행렬(W)의 곱을 각 성분의 순수 스펙트럼(M)으로 추정하고, 독립성분들(IC)을 상기 혼합물에 섞여 있는 성분들의 농도에 비례하는 값으로 추정한다.

<56> <실시에>

<57> 각각 다른 농도를 갖는 글루코오스(glucose)와 수크로오스(sucrose)가 섞여 있는 25 개의 샘플 수용액을 만들어 본 발명에 따른 주성분 분석 및 독립성분 분석을 순차적으로 실시하였다. 글루코오스와 수크로오스의 순수 스펙트럼은 도 2에 도시된 바와 같으며, 각각 글루코오스와 수크로오스의 농도를 달리하여 만든 25 개의 혼합물의 스펙트럼은 도 3에 도시된 바와 같다.

- <58> 도 3에 도시된 25 개의 혼합물의 스펙트럼에 대하여 주성분 분석 및 독립성분 분석을 실시하여 얻은 글루코오스와 수크로오스의 순수 스펙트럼은 도 4a 및 도 4b에서 그래프 G2로 나타나며, 이는 글루코오스와 수크로오스의 실제의 순수 스펙트럼을 나타내는 그래프 G1과 정성적인 모양이 유사함을 알 수 있다. 또한, 25 개의 혼합물의 스펙트럼에 대하여 주성분 분석 및 독립성분 분석을 실시하여 얻은 독립성분(IC1, IC2)는 도 5a 및 도 5b에 도시된 바와 같이 글루코오스와 수크로오스의 실제 시료의 농도와 서로 선형적인 관계를 보이는 것을 알 수 있다.
- <59> 한편, 상기한 본 발명은 또한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체에 컴퓨터가 읽을 수 있는 코드로서 구현하는 것이 가능하다. 예를 들면, 각각 다른 농도를 갖는 p 종류의 성분이 섞여 있는 n 개의 혼합물 샘플로부터 각 성분들의 순수 스펙트럼 및 농도를 추정하는 방법은, m 개의 파장을 이용하여 측정한 상기 n 개의 혼합물의 스펙트럼에 대하여 주성분분석을 실시하여 인자들과 각 인자에 대한 스코어로 나타내는 제1 프로그램, 상기 제1 프로그램에 의해 생성되는 인자들 중 사용하고자 하는 인자수를 선정하는 제2 프로그램, 및 상기 제2 프로그램에 의해 선정된 인자들의 스코어에 대하여 독립성분분석을 실시하여 혼합행렬과 독립성분들로 분해하고, 상기 제2 프로그램에 의해 얻어진 인자와 상기 혼합행렬의 곱을 각 성분의 순수 스펙트럼으로 추정하고, 상기 독립성분들을 상기 혼합물에 섞여 있는 성분들의 농도에 비례하는 값으로 추정하는 제3 프로그램을 기록한 컴퓨터가 읽을 수 있는 기록매체로 구현가능하다. 컴퓨터가 읽을 수 있는 기록매체는 컴퓨터 시스템에 의하여 읽혀질 수 있는 데이터가 저장되는 모든 종류의 기록장치를 포함한다. 컴퓨터가 읽을 수 있는 기록매체의 예로는 ROM, RAM, CD-ROM, 자기 테이프, 플로피디스크, 광데이터 저장장치 등이 있으며, 또한 캐리어 웨이브(예를 들어 인터넷을

통한 전송)의 형태로 구현되는 것도 포함한다. 또한 컴퓨터가 읽을 수 있는 기록매체는 네트워크로 연결된 컴퓨터 시스템에 분산되어, 분산방식으로 컴퓨터가 읽을 수 있는 코드가 저장되고 실행될 수 있다.

<60> 그리고 본 발명을 구현하기 위한 기능적인(functional) 프로그램, 코드 및 코드 세그먼트들은 본 발명이 속하는 기술분야의 프로그래머들에 의해 용이하게 추론될 수 있다.

【발명의 효과】

<61> 상술한 바와 같이 본 발명에 따르면, 혼합물의 스펙트럼에 대하여 주성분분석과 독립성분분석을 적용함으로써, 혼합물의 농도에 관한 추가적인 정보가 존재하지 않더라도 혼합물에 대한 스펙트럼만으로 혼합물을 구성하는 성분의 수, 각 성분들의 순수 스펙트럼 및 농도를 정확하게 추정할 수 있는 이점이 있다. 또한, 본 발명은 흡수 스펙트럼, 발광 스펙트럼, 질량분석 스펙트럼, 자기공명 스펙트럼, 크로마토그래피 등 모든 스펙트럼 분석에 적용할 수 있는 이점이 있다.

<62> 이상 도면과 명세서에서 최적 실시예들이 개시되었다. 여기서 특정한 용어들이 사용되었으나, 이는 단지 본 발명을 설명하기 위한 목적에서 사용된 것이지 의미 한정이나 특허청구범위에 기재된 본 발명의 범위를 제한하기 위하여 사용된 것은 아니다. 그러므로 본 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서, 본 발명의 진정한 기술적 보호 범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

【특허청구범위】**【청구항 1】**

각각 다른 농도를 갖는 p 종류의 성분이 섞여 있는 n 개의 혼합물 샘플로부터 각 성분들의 순수 스펙트럼 및 농도를 추정하는 방법에 있어서,

(a) m 개의 파장을 이용하여 측정한 상기 n 개의 혼합물의 스펙트럼에 대하여 주 성분분석을 실시하여 인자들과 각 인자에 대한 스코어로 나타내는 단계;

(b) 상기 (a) 단계에서 생성되는 인자들 중 사용하고자 하는 인자수를 선정하는 단계; 및

(c) 상기 (b) 단계에서 선정된 수의 인자의 스코어에 대하여 독립성분분석을 실시하여 각 성분의 순수 스펙트럼과 농도를 추정하는 단계를 포함하는 혼합물로부터 순수 스펙트럼 및 농도 추정방법.

【청구항 2】

제1 항에 있어서, 상기 혼합물을 구성하는 성분들의 농도는 서로 독립적인 것을 특징으로 하는 혼합물로부터 순수 스펙트럼 및 농도 추정방법.

【청구항 3】

제1 항 또는 제2 항에 있어서, 상기 (c) 단계는

(c1) 상기 인자들의 스코어에 대하여 독립성분분석을 실시하여 혼합행렬과 독립성분들로 분해하는 단계;

(c2) 상기 (b) 단계에서 선정된 인자와 상기 (c1) 단계에서 얻어진 혼합행렬의 곱을 각 성분의 순수 스펙트럼으로 추정하는 단계; 및

(c3) 상기 (c1) 단계에서 얻어진 독립성분들을 상기 혼합물에 섞여 있는 성분들의 농도에 비례하는 값으로 추정하는 단계로 이루어지는 혼합물로부터 순수 스펙트럼 및 농도 추정방법.

【청구항 4】

제1 항에 있어서, 상기 (a) 단계에서는 m 개의 파장을 이용하여 측정한 상기 n 개의 혼합물의 스펙트럼 중 추정하고자 하는 성분 정보를 포함하며, 잡음이 작은 대역을 분석대역으로 선정하는 혼합물로부터 순수 스펙트럼 및 농도 추정방법.

【청구항 5】

제1 항에 있어서, 상기 (a) 단계에서는 m 개의 파장을 이용하여 측정한 상기 n 개의 혼합물의 스펙트럼에 대하여 주성분분석을 실시하기에 앞서 산란 및 잡음을 제거하기 위한 전처리를 수행하는 혼합물로부터 순수 스펙트럼 및 농도 추정방법.

【청구항 6】

각각 다른 농도를 갖는 p 종류의 성분이 섞여 있는 n 개의 혼합물 샘플로부터 각 성분들의 순수 스펙트럼 및 농도를 추정하기 위하여,

m 개의 파장을 이용하여 측정한 상기 n 개의 혼합물의 스펙트럼에 대하여 주성분 분석을 실시하여 인자들과 각 인자에 대한 스코어로 나타내는 제1 프로그램;

상기 제1 프로그램에 의해 생성되는 인자들 중 사용하고자 하는 인자수를 선정하는 제2 프로그램; 및

상기 제2 프로그램에 의해 선정된 인자들의 스코어에 대하여 독립성분분석을 실시하여 혼합행렬과 독립성분들로 분해하고, 상기 제2 프로그램에 의해 얻어진 인자와 상기

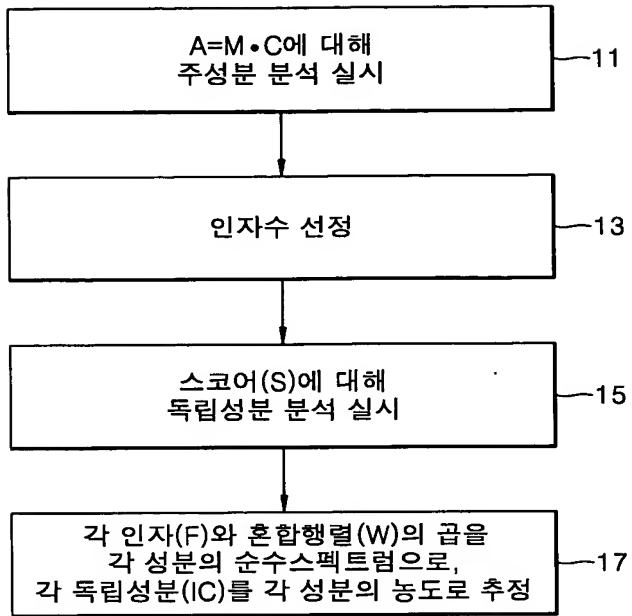
혼합행렬의 곱을 각 성분의 순수 스펙트럼으로 추정하고, 상기 독립성분들을 상기 혼합물에 섞여 있는 성분들의 농도에 비례하는 값으로 추정하는 제3 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체.

【청구항 7】

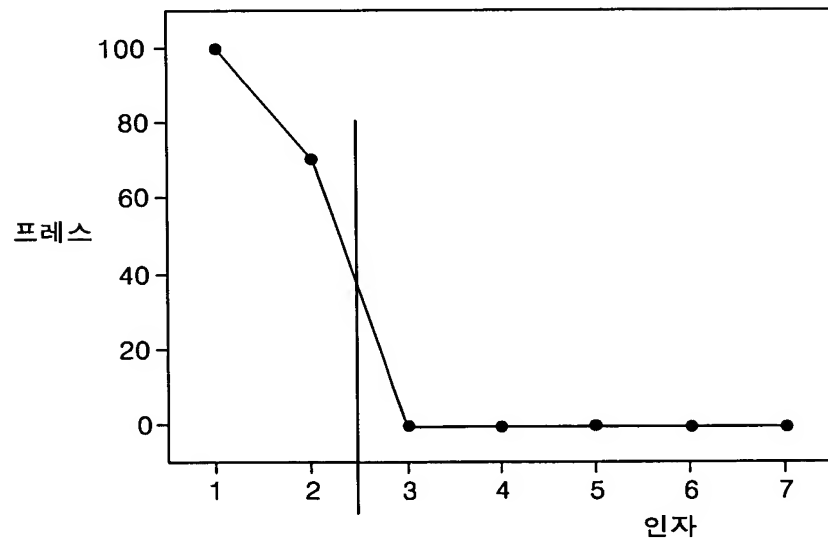
제6 항에 있어서, 상기 혼합물을 구성하는 성분들의 농도는 서로 독립적인 것을 특징으로 하는 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체.

【도면】

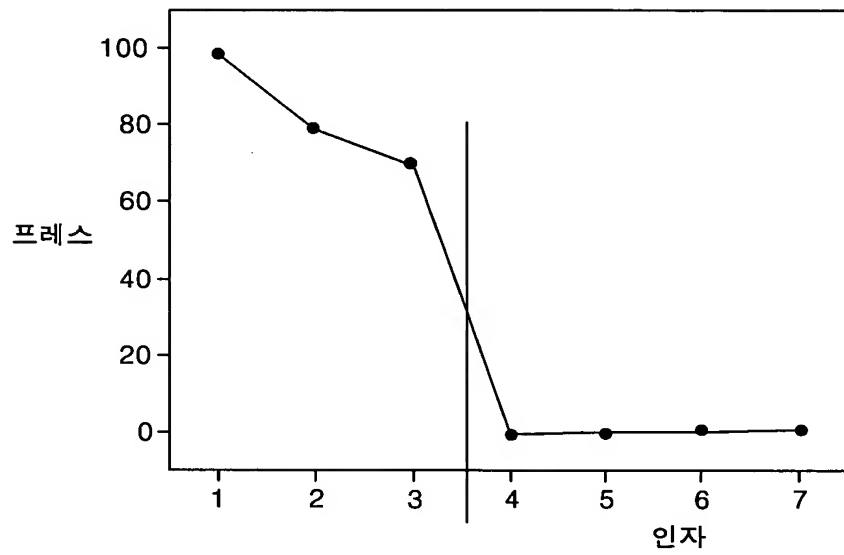
【도 1】



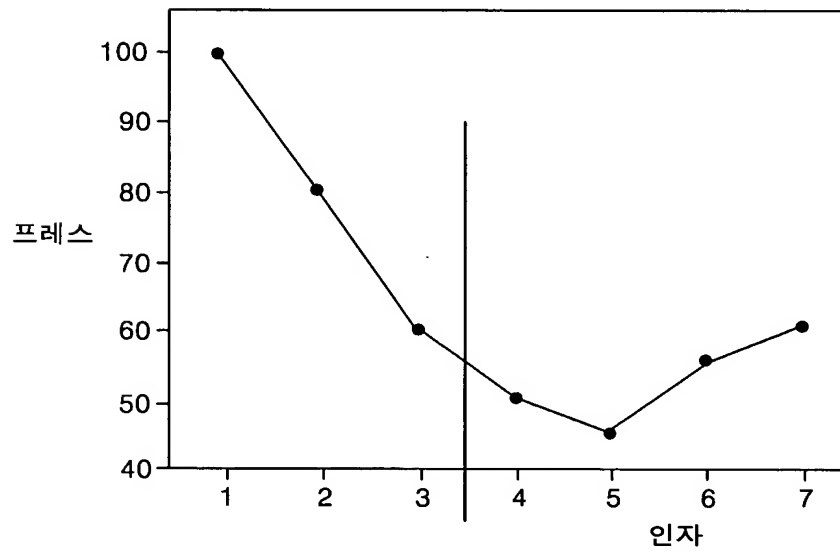
【도 2a】



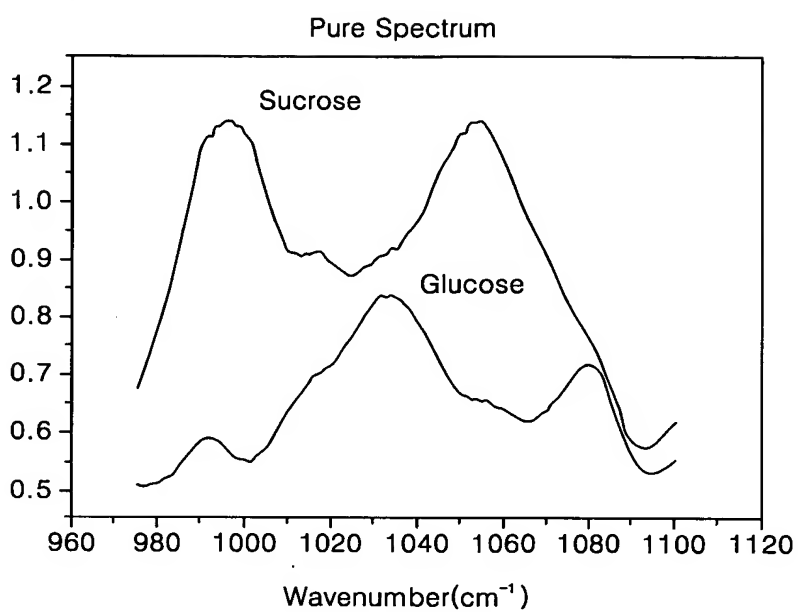
【도 2b】



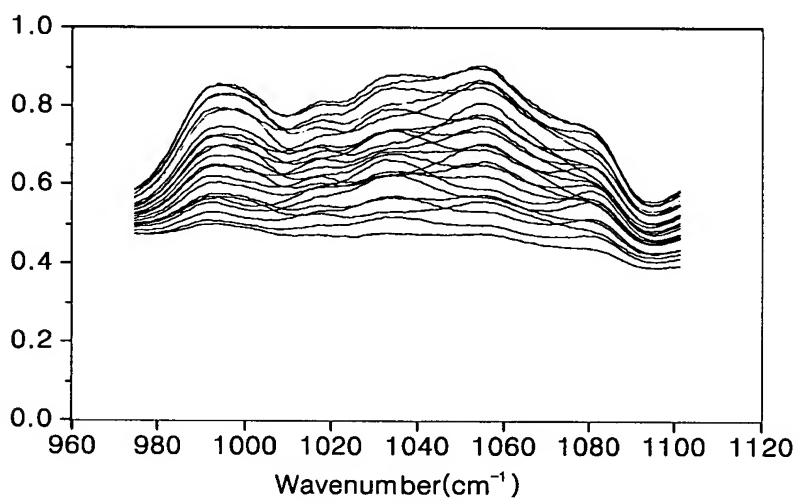
【도 2c】



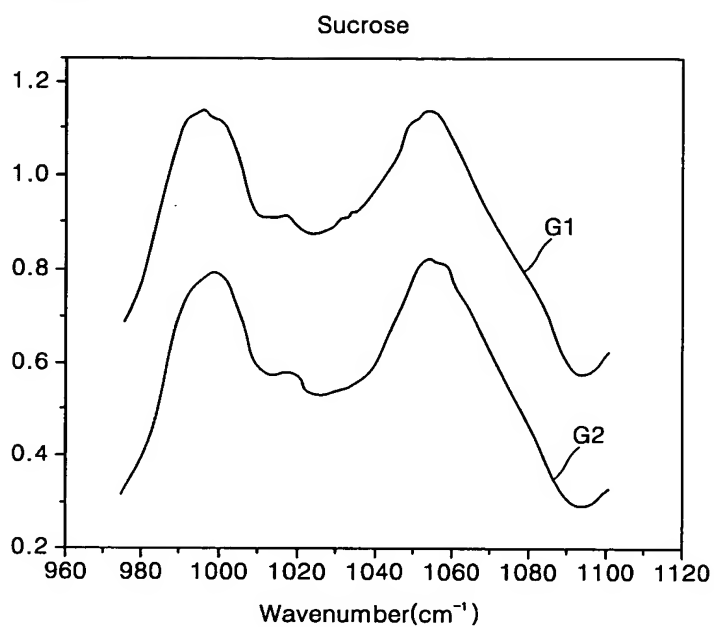
【도 3】



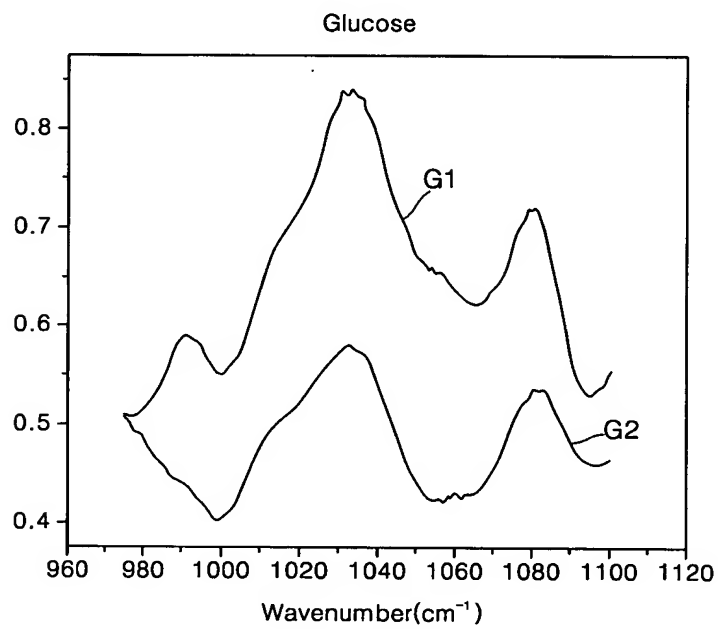
【도 4】



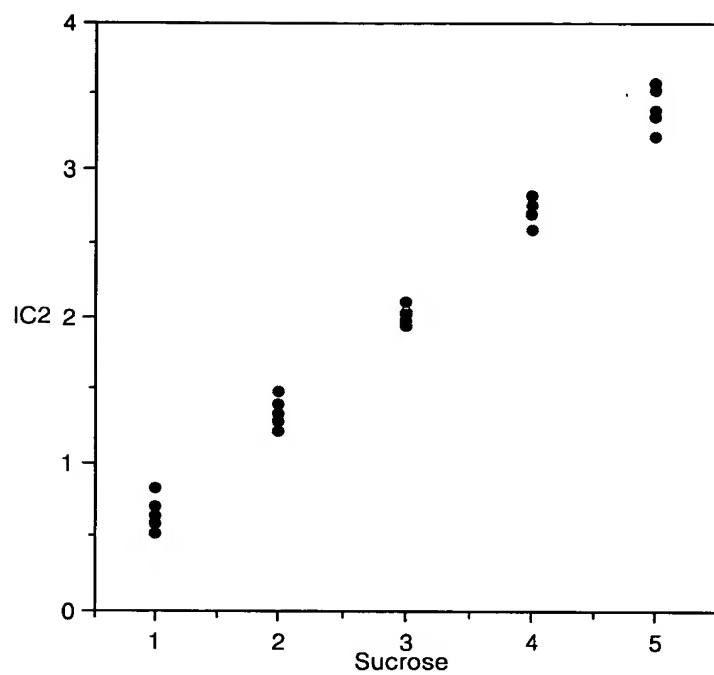
【도 5a】



【도 5b】



【도 6a】



【도 6b】

